

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

**ПРИБОРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ
ПРОЕКТИРОВАНИЕ
КОМПОНЕНТНОЙ БАЗЫ МИКРО-
И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ**

Учебно-методическое пособие

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2016

Содержание

1. Физико-математические модели технологических процессов в микро- и наноэлектронике	5
1.1. Модели термического окисления	5
1.1.1. Физико-химические основы модели Дила – Гроува	5
1.1.2. Линейный и параболический законы роста окисла	5
1.1.3. Аномальные эффекты при начальном окислении	6
1.1.4. Вязкоупругая модель локального окисления.....	7
1.2. Модели диффузионных процессов	9
1.2.1. Уравнения диффузии Фика	9
1.2.2. Модели коэффициентов диффузии основных примесей в кремнии	11
1.2.3. Аналитические модели распределения примесей при диффузии в неограниченной, полуограниченных и ограниченных подложках	14
1.2.4. Моделирование процесса диффузии на стадиях загонки и разгонки примесей	16
1.2.5. Многомерные задачи диффузии	18
1.2.6. Сегрегация примесей на границе окисел-полупроводник	19
1.2.7. Диффузионное перераспределение примесей в окислительной среде	20
1.2.8. Численные методы решения уравнений Фика	22
1.3. Физико-математические модели процесса ионной имплантации	25
1.3.1. Основы теории ЛШШ	25
1.3.2. Распределения ионно-имплантированных примесей: гауссовские распределения, сопряженная гауссиана, распределение Пирсон-4	27
1.3.3. Распределения ионно-имплантированных примесей при легировании разориентированных мишеней	31
1.3.4. Методы моделирования распределения ионно-имплантированных примесей в многослойных структурах	33
1.3.5. Локальное легирование методом ионной имплантации	36
1.3.6. Наклонная имплантация	39
1.3.7. Диффузионное перераспределение ионно-имплантированных примесей	42
1.4. Математические модели расчета электрофизических параметров полупроводниковых структур	44
2. Приборно-технологическое проектирование в САПР TCAD	46
2.1. Работа в среде приборно-технологической САПР TCAD	46
2.1.1. Состав приборно-технологической САПР TCAD	46
2.1.2. Визуализация результатов численных экспериментов	52
2.2. Моделирование технологии элементной базы микроэлектроники и твердотельной электроники в специализированном пакете САПР TCAD	56
2.2.1. Программные модули моделирования технологических процессов	56
2.2.2. Моделирование стандартных технологических процессов	63

$$B/A = 1,04 \cdot 10^5 \cdot \exp(-2,0/kT), \text{ мкм/мин};$$

– пары воды:

$$B = 280 \cdot \exp(-1,17/kT), \text{ мкм}^2/\text{мин}, \quad T \leq 950 \text{ }^\circ\text{C};$$

$$B = 7 \cdot \exp(-0,78/kT), \text{ мкм}^2/\text{мин}, \quad T > 950 \text{ }^\circ\text{C};$$

$$B/A = 3,45 \cdot 10^4 \cdot \exp(-1,6/kT), \text{ мкм/мин}, \quad T \leq 950 \text{ }^\circ\text{C};$$

$$B/A = 2,95 \cdot 10^6 \cdot \exp(-2,05/kT), \text{ мкм/мин}, \quad T > 950 \text{ }^\circ\text{C},$$

где k – постоянная Больцмана, $8,62 \cdot 10^{-5}$ эВ/К; T – температура, К.

Параболическая константа B слабо зависит от ориентации кремниевой подложки, в то время как линейная константа $B/A_{(100)}$ при окислении кремния с ориентацией (100) меньше $B/A_{(111)}$ в 1,68 раз.

Константы B и B/A прямо пропорциональны парциальному давлению окислителя p^n . Показатель степени n зависит от окислительной среды, ориентации подложки, наличия примесей.

1.1.3. Аномальные эффекты при начальном окислении

Модель Дила – Гроува хорошо описывает рост окисла кремния толщиной более 30 нм. Экспериментально было обнаружено, что при малых толщинах окислов скорость окисления превышает в 2–3 раза скорость, предсказываемую линейно-параболической моделью Дила – Гроува.

Одна из феноменологических моделей, объясняющих аномально быстрый рост окисла на начальном этапе, предложена Румаком.

На первом этапе идёт диффузия молекул кислорода O_2 в кремний. При этом образуются две зоны роста SiO_2 : приповерхностный слой кремния и переходной слой окисла (рис. 1.1). На кремнии 1 наряду с растущим окислом 2 при диффузии молекул O_2 кислорода 3 появляются зародыши окисла SiO_2 4 и избыточные атомы кремния 5 (рис. 1.1, стадия I).

Существование потенциального барьера на границе SiO_2 –Si приводит к накоплению избыточных атомов кремния 6 (рис. 1.1, стадия II). Их концентрация может превышать равновесную $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$, что приводит к появлению больших напряжений.

При этом идёт преимущественный рост зародышей SiO_2 в кремнии, захват избыточного кремния 6 растущим окислом, генерация дефектов упаковки и дислокаций в кремнии, разрушение плёнки естественного окисла на кремнии между зародышами и возникновение микропор 7 в растущей плёнке окисла (рис. 1.1, стадия III). Образование микропор облегчает перенос кислорода 8 в зону реакции и диффузию избыточного кремния, например, в составе монооксида кремния SiO 9 в атмосферу.

Добавочный перенос кислорода по микропорам ускоряет рост окисла, и микропоры 11 постепенно уменьшаются (рис. 1.1, стадия IV).

Одна из моделей (SUPREM-III) аппроксимирует зависимость скорости роста окислов на начальном этапе с помощью следующей модификации линейно-параболического закона (модель Массуда):

$$\frac{dx}{dt} = \frac{B}{A + 2x} + k_1 e^{-\frac{x}{L_1}} + k_2 e^{-\frac{x}{L_2}},$$

где k_1, k_2 – константы, подчиняющиеся закону Аррениуса; L_1, L_2 – характеристические толщины, $L_1 \approx 20 \text{ \AA}$, $L_2 \approx 70 \text{ \AA}$.

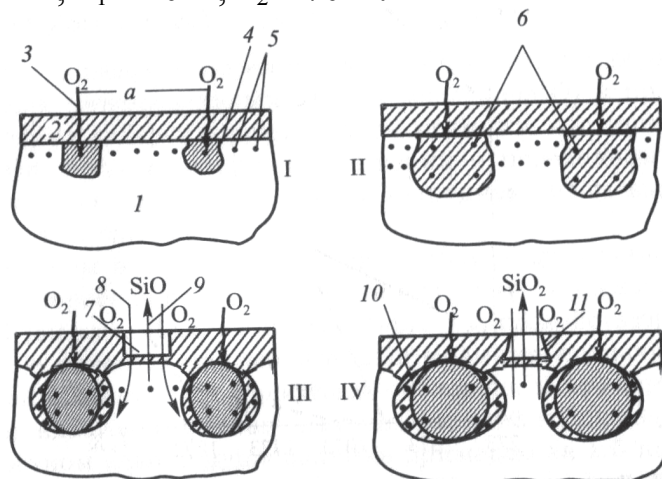


Рис. 1.1. Начальные стадии окисления кремния в сухом кислороде

1.1.4. Вязкоупругая модель локального окисления

При локальном окислении на поверхности кремния формируется защитная маска нитрида кремния, с нанесённым тонким буферным слоем окисла, который предотвращает возникновение на границе $\text{Si}_3\text{N}_4\text{--Si}$ больших напряжений при окислении.

Диффузия молекул окислителя происходит как в вертикальном направлении, так и латерально под край нитридной маски. Локальная область окисления под краем защитной маски имеет форму «птичий клюв» (рис. 1.2), а при формировании рельефного участка, полученного предварительным травлением кремния на некоторую глубину, за счёт увеличения окисла по периметру вытравленной области образуется окисный профиль «птичья голова».

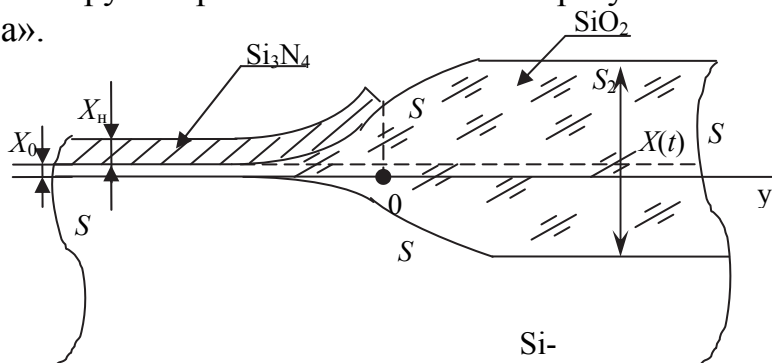


Рис. 1.2. Модель роста окисла с профилем «птичий клюв»

При численном моделировании учитываются вязкоупругие свойства материалов, и при этом решаются одновременно уравнения Лапласа, Навье – Стокса, уравнение непрерывности, диффузии и перемещения границ слоя SiO₂ с соответствующими граничными условиями.

В установившемся стационарном режиме окисел рассматривается как вязкая, несжимаемая жидкость, описываемая уравнением Лапласа

$$D\nabla^2 C(x, y) = 0,$$

где коэффициент диффузии окислителя не зависит от концентрации окислителя и напряжений в окисле.

При большой вязкости и малой скорости роста (менее 1 нм/с), когда упругие напряжения быстро релаксируют, движение описывается уравнением Навье – Стокса

$$-\eta \nabla^2 v = \nabla p,$$

где η – вязкость окисла; v – скорость движения; p – давление.

Окисел считается несжимаемым, поэтому его движение рассматривается как вязкое течение несжимаемой жидкости, которое описывается уравнением непрерывности

$$\Delta v = 0.$$

Решение полученной системы уравнений находится при следующих граничных условиях.

В области S_1 (рис. 1.2) скорость движения границы SiO₂–Si пропорциональна потоку F окислителя с учётом отношения b объёмов окисла и прошедшего на его формирование объёма кремния ($b \approx 0,44$)

$$v = \frac{(1-b)F}{N},$$

где N – число молекул окислителя в единице объёма окисла.

На границе S_2 учитывается поверхностное натяжение, рассматриваемое как разность давлений внутри p и вне $p_{\text{атм}}$ окисла с учётом коэффициента γ поверхностного натяжения и локального радиуса R кривизны поверхности:

$$p - p_{\text{атм}} = -\frac{\gamma}{R}.$$

В области S_3 под маской жидкость не проскальзывает, а прилипает, поэтому скорость $\vec{v}i = 0$, где $\vec{v} = (v_x/v_y)$, \vec{i} – единичный вектор, касательный к поверхности. В стационарном случае $v = 0$.

В областях S_4 и S_5 также давление равно нулю:

$$p = 0; \quad \vec{v}n = 0,$$

где \vec{n} – единичный вектор по нормали к поверхности.

При взаимодействии окислителя с кремнием скорость окисления в области S_1 равна $\vec{v} = \beta C \vec{n}$, и поток окислителя, идущего на образование окисла, есть $D \frac{\partial C}{\partial n} = kC$, где k – коэффициент химической реакции.

На границе S_2 поток окислителя пропорционален коэффициенту массопереноса h и разности концентраций окислителя вне C^* и внутри C_0 границы S_2 :

$$D \frac{\partial C}{\partial n} = h(C^* - C_0(x, y)).$$

На границах S_3, S_4, S_5 потоки равны нулю: $D \frac{\partial C}{\partial n} = 0$.

Обобщенная упруговязкопластическая модель учитывает влияние упругих напряжений и на механизм диффузии окислителя:

$$\nabla \left(D \nabla C + \frac{D}{RT} C \nabla p_m \right) = 0,$$

где R – универсальная газовая постоянная; p_m – механический потенциал.

Поставленная задача решается численными методами, основанными на использовании теоремы Грина.

Толщину окисла $X(y, t)$ «птичий клюв» при начальной толщине X_0 буферного слоя окисла можно аппроксимировать следующим соотношением:

$$X(y, t) = X_0 + (X(t) - X_0) \cdot \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\gamma} \frac{y}{X(t) - X_0} \right) \right],$$

где $X(t)$ – толщина окисла вне области нитридной маски; γ – параметр бокового распространения окисла под край нитридной маски ($\gamma \approx 0,5$).

Учёт ширины ω окна в нитридной маске и толщины X_n защитного слоя Si_3N_4 осуществляется в следующих аналитических моделях:

$$X(y, t, \omega) = \frac{X(y, t)}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(-\frac{y}{2} \frac{1}{\sqrt{D_y t}} \right) - \operatorname{erfc} \left(-\frac{y - \omega}{2\sqrt{D_y t}} \right) \right\}^{1/2},$$

где D_y – коэффициент диффузии окислителя в латеральном направлении

$$D_y = 6,81 \cdot 10^{-4} \frac{X_0[\text{нм}] + 143}{X_n[\text{нм}] + 584} - 1,14 \cdot 10^{-4}, \text{ мкм/мин.}$$

1.2. Модели диффузионных процессов

1.2.1. Уравнения диффузии Фика

В кремниевой планарной технологии процессы создания диффузионных областей описываются с помощью законов Фика. Согласно первому закону Фика поток J диффундирующей примеси состоит из диффузионной и дрейфовой компонент:

$$J = -D\nabla C - Z\mu NE, \quad (1.3)$$

где D – коэффициент диффузии атомов примеси; ∇ – оператор градиента; $C \equiv C(x, y, z, t)$ – концентрация примеси, зависящая от координат x, y, z и времени диффузии t ; Z – зарядовое состояние ионов примеси ($+1$ – для акцепторов, -1 – для доноров); μ – подвижность заряженных ионов; $N \equiv N(x, y, z, t)$ – концентрация ионизированных атомов примеси; E – напряженность внутреннего электростатического поля, созданного градиентом концентрации ионизированных атомов примеси.

Из закона сохранения вещества следует второй закон Фика:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(D\nabla C + Z\mu NE). \quad (1.4)$$

Решение данного дифференциального уравнения в частных производных второго порядка проводится при различных начальных и граничных условиях, вид которых зависит от выбранных приближений.

Современные модели диффузии рассматривают этот процесс на атомистическом уровне, позволяющем объяснить и смоделировать возникающие основные физические эффекты. Генерация вакансий (например, при ионной обработке мишеней) и неравновесные процессы (например, на границе раздела $\text{SiO}_2\text{--Si}$ при окислении) определяют «дальнодействующие» эффекты. «Локальные» эффекты обусловлены концентрацией примеси: кулоновское взаимодействие атомов примеси с заряженными вакансиями; возникновение внутренних электростатических полей, ускоряющих диффузию; кластеризация и преципитация примесей; генерация заряженных вакансий вследствие деформации решетки.

Указанные эффекты сильно влияют на диффузию примесей в кремнии, причем, при моделировании распределений примесей необходимо для каждой примеси и условий процесса установить влияющие на коэффициент диффузии факторы.

Одним из важнейших факторов является наличие внутренних электростатических полей, влияние которых приводит к увеличению эффективного коэффициента диффузии в h раз:

$$h = 1 + \frac{N}{2n_i} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{N}{2n_i}\right)^2 + 1}}, \quad (1.5)$$

где n_i – собственная концентрация электронов при температуре диффузии, определяемая из трансцендентного уравнения

$$n_i^2 = 1,5 \cdot 10^{33} T^3 \exp\left(-\frac{1,21 + 7,1 \cdot 10^{-10} \sqrt{n_i/T}}{kT}\right), \text{ см}^{-6},$$